



МОЛОДЕЖЬ В НАУКЕ — *2006*

Сборник трудов
Международной научной
конференции молодых ученых
(Минск, 16 — 19 октября 2006 г.)



Часть 2

STRUCTURAL FEATURES OF JACOBI CODES AND THE OPTIMIZATION OF VECTOR-MATRIX MULTIPLICATION BY MEANS OF THE FAST HADAMARD TRANSFORM

Belarusian State University of Informatics and RadioElectronics, Minsk

Summary

Jacobi code sequences having one-level periodic autocorrelation functions and block lengths equal to $2^r - 1$ connected with Hadamard difference sets are considered. It is shown that cyclic codes of such type are maximal-length codes and the optimization of vector-matrix multiplication with using their matrices by means of the fast Hadamard transform is possible. There are two fast algorithms of vector-matrix multiplication produced, the second one using the principle of «two» has the minimal quantity of calculations.

УДК 535.37

A. С. Сумар, К. А. Саечников

НЕЛИНЕЙНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МОЛЕКУЛ 9-ЦИАНОАНТРАЦЕНА, ОХЛАЖДЕННЫХ В СВЕРХЗВУКОВОЙ СТРУЕ

*Белорусский государственный педагогический университет
им. М. Танка, Минск*

Несмотря на довольно большое количество исследований, связанных с изучением структуры изолированных молекул и их Ван-дер-Ваальсовых комплексов, охлажденных в сверхзвуковой струе, влиянием комплексообразования на внутримолекулярные колебания, проявлением релаксационных процессов в возбужденных состояниях молекул и комплексов, колебательной предиссоциации, остаются недостаточно изученными вопросы, касающиеся формирования колебательной структуры в спектрах изолированных молекул и комплексов при интенсивном лазерном возбуждении.

Целью работы является разработка новых методов получения информации о динамике релаксационных процессов из результатов нелинейно-спектроскопических экспериментов; установление закономерностей фотофизических процессов в струйно-охлажденных молекулах при воздействии импульсного интенсивного лазерного излучения.

Материалы и методы исследований. Экспериментальные исследования проведены на базе лаборатории кафедры лазерной физики и спектроскопии БГУ и лаборатории лазерной физики БГПУ. В качестве объекта исследования использовался 9-цианоантрацен.

Экспериментальная установка состоит из трех блоков: источника возбуждения, вакуумной системы и системы регистрации. Вторая гармоника лазера на АИГ:Nd³⁺ с модуляцией добротности (лазер LS-2124), частотой следования импульсов 10 Гц и длительностью импульса 9 нс используется для накачки твердотельного лазера на сапфире с титаном (Al₂O₃:Ti³⁺). Твердотельный преобразователь «Титан» позволяет получать плавно перестраиваемое лазерное излучение в спектральном диапазоне от 714 до 900 нм с шириной линии излучения 5 см⁻¹. С использованием нелинейного кристалла KDP излучение основной частоты лазера на сапфире с титаном преобразовывалось во вторую гармонику. При максимальной энергии накачки импульсами второй гармоники АИГ:Nd³⁺ лазера 100 мДж энергия импульсов преобразованного излучения Al₂O₃:Ti³⁺ лазера на длине волны 375 нм составляла 0,3 мДж. Энергия импульсов лазера накачки контролировалась системой контроля интенсивности и варьировалась путем изменения энергии накачки. Преобразованное лазерное излучение фокусировалось в сверхзвуковую струю. Вакуумная система с системой формирования Ван-дер-Ваальсовых комплексов аналогична описанной ранее в [1].

Результаты исследований и их обсуждение. Анализ распределения интенсивностей линий в спектрах флуоресценции показывает, что при переходе к интенсивному лазерному возбуждению существенным образом меняется характер распределения интенсивностей соответствующих вибронных полос в спектрах. Разумно предположить, что формирование структуры спектров флуоресценции при интенсивном лазерном возбуждении существенным образом связано с эффектами повторного возбуждения электронно-колебательных состояний за время, сравнимое с длительностью возбуждающего импульса, так как процессов внутримолекулярного колебательного перераспределения, как было показано в [2], для вибронных уровней с $E_{\text{кол}} \leq 751 \text{ см}^{-1}$ не наблюдалось. При рассмотрении механизмов формирования структуры спектров флуоресценции при интенсивном лазерном возбуждении, в частности, в частоту 0–0-перехода и 215 см⁻¹ следует учитывать следующие процессы.

1. Флуоресценцию с непосредственно возбуждаемого уровня. Распределение интенсивности в этой компоненте должно

быть аналогичным распределению интенсивностей в аналогичных спектрах флуоресценции при низко интенсивном лазерном возбуждении.

2. Флуоресценцию с более высоких вибронных подуровней возбужденного состояния, заселяемых вследствие эффектов повторного возбуждения в течение длительности возбуждающего импульса с колебательных подуровней нижнего электронного состояния. Таким образом, реализуется ситуация частично охлажденной молекулы с возможностью одновременного возбуждения как с уровня с нулевой колебательной энергией, так и с других заселенных колебательных подуровней основного электронного состояния. Таким образом, распределение интенсивностей в результирующем спектре будет являться результатом суперпозиции нескольких спектров, каждый из которых будет представлен в итоговом спектре с соответствующим «весом», определяемым вероятностью перехода с исходного возбужденного вибронного состояния на колебательные подуровни основного электронного состояния.

В работе [2] показано, что при возбуждении в $E_{\text{кол}} > 751 \text{ см}^{-1}$ спектры флуоресценции содержат все признаки эффективного внутримолекулярного колебательного перераспределения (ВКП), реализующегося по «ступенчатому» механизму с заселением промежуточных по энергии внутримолекулярных уровней, активных в вибронных переходах с участием нулевого состояния. В частности, спектр флуоресценции с колебательного подуровня 1155 см^{-1} уже содержит все признаки эффективного ВКП. Однако в промежутке $751\text{--}1155 \text{ см}^{-1}$ [2] интенсивного заселения колебательных подуровней нижнего электронного состояния не происходит, поэтому можно предположить, что и вклад спектров флуоресценции с этих колебательных подуровней в интенсивность суммарного спектра будет также ничтожным. А вклад спектров флуоресценции с $E_{\text{кол}} \geq 1155 \text{ см}^{-1}$ можно учесть, придав больший вес основному спектру флуоресценции с нулевого колебательного подуровня возбужденного электронного состояния. В рамках высказанного предположения о структуре спектров флуоресценции при интенсивном возбуждении в частоту $0\text{--}0$ -перехода и на колебательный подуровень 215 см^{-1} следует ожидать, что результирующий спектр может быть смоделирован как сумма взятых с определенными «весами» спектров флуоресценции, полученных при возбуждении на различные промежуточные колебательные подуровни.

Проведенное моделирование показало, что общая картина динамики молекул в возбужденных состояниях при интенсив-

ном лазерном возбуждении определяется рядом взаимовлияющих процессов, приводящих к характерным спектроскопическим проявлениям.

1. «Ступенчатое» перевозбуждение с последующей флуоресценцией с более высоких колебательных подуровней, в результате чего результирующий спектр флуоресценции является суперпозицией спектра флуоресценции с исходного возбужденного колебательного подуровня и спектров флуоресценции с более высоких колебательных подуровней, заселенных в результате процессов последующих возбуждений за время, сопоставимое с длительностью возбуждающего импульса. Эти эффекты наиболее ярко проявляются в высокочастотной части спектра.

2. При возбуждении молекул на более высокие колебательные подуровни, а также в результате процессов последующих возбуждений, приводящих к заселению высоких колебательных подуровней, эффективно сказываются процессы ВКП, приводящие к перераспределению энергии в возбужденном состоянии и к заселению промежуточных по энергии внутримолекулярных колебательных подуровней (по «ступенчатому» механизму) активных в излучательных переходах. Эти эффекты характерны для всего спектра флуоресценции в целом и проявляются как увеличение суммарного фонового пьедестала, на котором выступает характерная гребенка тонкоструктурных линий спектра.

Литература

1. Гулис И. М., Саечников К. А., Цвирко В. А. // Вестник БГУ. Серия 1. — 1989. — № 2. — С. 19—21.
2. Гулис И. М., Комяк А. И., Саечников К. А., Цвирко В. А. // Журнал прикладной спектроскопии. — 1998. — Т. 65, № 2. — С. 184—191.

A. S. Sumar, K. A. Saechnikov

NONLINEAR SPECTROSCOPY OF THE JET-COOLED 9-CYANOANTHRACENE MOLECULES

Belarusian M. Tank State Pedagogical University, Minsk

Summary

A dynamics of the relaxation processes in excited vibronic states of 9-cyanoanthracene molecules has been studied by the method of nonlinear fine-structure spectroscopy of the isolated jet-cooled molecules. The intensity distribution in fluorescence spectra on excitation to the particular electronic vibrational sublevels has been numerically simulated. Possible mechanisms of the proceeding processes have been discussed.